

SZILÁRD ANYAGOK RUGALMAS, HŐTÁGULÁSI, KÉPLÉKENY ÉS REOLÓGIAI FOLYAMATAINAK TERMOMECHANIKÁJA – ELMÉLET ÉS KÍSÉRLET

Asszonyi Csaba

MONTAVID TERMODINAMIKAI KUTATÓCSOPORT, BUDAPEST

Csatár Attila

MEZŐGAZDASÁGI GÉPESÍTÉSI INTÉZET, GÖDÖLLŐ,
MONTAVID TERMODINAMIKAI KUTATÓCSOPORT, BUDAPEST

Fülöp Tamás

BME ENERGETIKAI GÉPEK ÉS RENDSZEREK TANSZÉK, BUDAPEST,
MONTAVID TERMODINAMIKAI KUTATÓCSOPORT, BUDAPEST

Szilárd anyagok rugalmas, hőtágulási, képlékeny és reológiai jelenségeinek egy termodinamika-alapú elméletét mutatjuk be. Megközelítésünk egyrésről az érintett kinematikai mennyiségek egy egyszerű definícióján alapul. Eszerint a rugalmas deformáltság a test pillanatnyi metrikájának a relaxált metrikájától való eltérését fejezi ki, a hőtágulás a relaxált metrika egy hőmérsékletfüggő változása, míg a képlékenyedés egy tartós változása. Tárgyalásunk másik pillére a nemegyensúlyi termodinamika. A konstitutív egyenleteket úgy választjuk meg, hogy tiszteljék a termodinamikai konzisztenciát, és a második főtételt konstruktív, kvantitatív módon használjuk ki. A képlékenyedés szokásosan elvárt tulajdonságai természetes módon illeszkednek az elméletbe. A reológiát az irreverzibilis termodinamika belső változós módszertanával vezetjük be. A különböző jellegzetes viselkedéseket kísérleti eredményeken illusztráljuk, mely kísérletekben megnyújtott műanyag minták rugalmas, hőtágulási, képlékeny és reológiai változásokon mennek keresztül. A mért adatokból meghatározzuk a reológiai együtthatókat. A mechanikai mennyiségek mellett a hőmérséklet változásait is nyomon követjük, és az elmélettel is számot adunk róluk.¹

BEVEZETÉS

Az elmúlt években kutatásunk egyik fő célja az volt, hogy ötvözzük az anyagi objektivitás problémájára adott, Matolcsi munkásságán [1][2][3][4] alapuló megoldásun-

¹ Az "Elastic, thermal expansion, plastic and rheological processes – theory and experiment", folyóirathoz közlésre benyújtott cikk fordítása.

kat [5][6][7][8] azzal az irreverzibilis termodinamikai módszertannal, mely a termodinamikai stabilitásra és a második főtétele konstruktív, kvantitatív kiaknázására fókuszál [9][10][11][12]. Jelen írásban e program eredményét mutatjuk be szilárd anyagok kontinuum-termodinamikájára.

Az elmélet által jelenleg lefedett jelenségek:

- a (prompt) rugalmasság, mely egy mechanikai terhelésre adott azonnali válasz, és melynek során a mechanikai energia megmarad (ld. pl. Hooke törvényét);
- a reológia, mely az előzővel ellentétben egy késleltetett válasz, a mechanikai energia részbeni disszipációjával jár, és például viszkózus csillapításból eredhet;
- a képlékenyedés, mely egy tartós alakváltozás, a terheletlen alak megváltozása;
- a hőtágulás, és az általa generált hőfeszültség;
- a hővezetés.

Az általános szint – nagydeformációs tárgyalás, általános konstitutív egyenletek – ellenére célunk a hasznos gyakorlati példákon való alkalmazás (és ezek során az elmélet folyamatos tesztelése, fejlesztése is). Ennek érdekében kísérleteket végzünk, és az itt bemutatott mérési adatokkal is az elmélet kvalitatív és kvantitatív illusztrálása és ellenőrzése volt a célunk. Ezen az egyszerű, de jó bepillantást adó kísérleten – poliamid-6 műanyag minta egytengelyű nyújtása során mért mechanikai és hőmérsékleti változások – a különböző termomechanikai effektusok jól megfigyelhetők és mennyiségileg is jól magyarázhatónak bizonyulnak.

A kísérlettel való könnyebb összevethetőség érdekében formalizmusunk minden részletében a legegyszerűbb plauzibilis feltételezésekkel élünk: kis deformációk, Hooke-rugalmasság állandó rugalmasságtani együtthatókkal, állandó fajhő, hőtágulási együttható és hővezetési együttható, és állandó képlékenyedési ráta és képlékeny küszöbfeszültség. E feltételezéseket a mérési adatok a kísérleti pontosság keretén belül megnyugtatóan igazolják, amint azt látni fogjuk.

Beszámolónkban először az imént említett, objektivitás-tisztelő kinematikai mennyiségeket ismertetjük. Ezután körük építjük a rugalmasság, hőtágulás és képlékenyedés kontinuum-termodinamikai tárgyalását. Szemléltetjük, hogyan mutatkoznak meg a jóslott viselkedésformák kísérleti adatokon. Ezt követően a reológiát illesztjük az elméletbe, és rávilágítunk, hogyan jelentkeznek a reológiai hatások a mérési eredményeken mind a mechanikai, mind a hőmérsékleti oldalról. A példaként használt kísérleti minta reológiai együtthatóit meghatározzuk, és ismertetjük az ennek során fellépő numerikus nehézségeket és az áthidalásukra kidolgozott megoldásunkat. Végül összegezzük a legfontosabb eredményeket és tanulságokat, és vázoljuk a jövőbeli feladatokat és lehetőségeket. A Függelékben a kísérleti körülményeket mutatjuk be közelebbről.

1. A KINEMATIKAI MENNYISÉGEK

Kezdjük tehát az objektivitásbarát kinematikai mennyiségek definíciójának [5][6][7][8] tömör ismertetésével. Szilárd, folyékony és gáz halmazállapotú közegekre egyaránt igaz, hogy a közeg mozgása során bármely két anyagi pont között egy pillanatnyi távolság határozódik meg. Ez egy $\tilde{\mathbf{h}}$ pillanatnyi metrikát értelmez az anyagi sokaságon. Itt és a továbbiakban felülhullám jelzi az anyagi sokaságon értelmezett tenzorokat, melyek az anyagi érintőtérhez kötődnek. Szilárd közegek esetén az újszerű és fontos fogalom a $\tilde{\mathbf{g}}$ relaxált avagy sajátmetrika, mely a feszültségmentes, relaxált állapotban adja meg az anyagi pontok távolságait. Egy ilyen állapotban tehát $\tilde{\mathbf{h}} = \tilde{\mathbf{g}}$. A relaxált metrika a szilárd test relaxált alakját jellemzi.

A rugalmas állapotjelző céljára alkalmas kinematikai mennyiség a szimmetrikus

$$\tilde{\mathbf{A}} = \tilde{\mathbf{g}}^{-1}\tilde{\mathbf{h}} \quad (1)$$

rugalmas alaktenzorból – a jobb-Cauchy-Green tenzor objektív általánosításából – definiálható:

$$\tilde{\mathbf{D}} = \frac{1}{2} \ln \tilde{\mathbf{A}}. \quad (2)$$

Ez a $\tilde{\mathbf{D}}$ rugalmas deformáltságtenzor az, melytől a rugalmas feszültség, $\tilde{\boldsymbol{\sigma}}$ függ majd, lineárisan (Hooke-törvény) vagy nemlineárisan (pl. neo-Hooke-modell). Ez a logaritmikus – objektíven általánosított Hencky-deformáció – típusú (2) definíció kitüntetett, mind geometriailag ($\tilde{\mathbf{D}}$ gömbi része jellemzi a térfogati és a deviatorikus rész az állandó térfogatú változásokat, még nagy deformációk esetében is [5][13][14]), mind kísérletileg (így például kemény gumi és hasonló anyagok esetén a nagydeformációs feszültség ebben a logaritmikus tenzorban a leginkább lineáris [15][16], a nemlineáris rugalmasság ötparaméteres Murnaghan-modellje szintén ebben a logaritmikus változóban működtetethető a legjobban [17], és egyéb érvek is felsorakoztathatóak [18]).

A deformációgradiens (objektív általánosítása) révén az anyagi érintővektorok a lokális/laborrendszerbeli/téridőbeli térvektorokba szállíthatók át. Ennek révén anyagi tenzoraink ($\tilde{\mathbf{h}}$, $\tilde{\mathbf{A}}$ stb.) térszerű megfelelőikbe (\mathbf{h} , \mathbf{A} stb.) vihetők át. A $\tilde{\mathbf{h}}$ tenzor időbeli változása, és így \mathbf{A} időderiváltja az $\mathbf{L} = \mathbf{v} \otimes \bar{\mathbf{v}}$ sebességgradiens (és transzponáltja, $\mathbf{L}^T = \bar{\mathbf{v}} \otimes \mathbf{v}$) segítségével fejezhető ki: az $\dot{\mathbf{A}}$ együttmozgó időderiváltra

$$\dot{\mathbf{A}} = \mathbf{L}\mathbf{A} + \mathbf{A}\mathbf{L}^T \quad (3)$$

adódik, ha csakis rugalmas változásokra szorítkozunk ($\tilde{\mathbf{g}} = \text{const.}$).

A hőtágulás az a jelenség, amikor a feszültségmentes és relaxált méretek, így a szilárd anyag relaxált metrikája hőmérsékletfüggő: $\tilde{\mathbf{g}} = \tilde{\mathbf{g}}(T)$, ahol T az abszolút hőmérsékletet jelöli. Ha az anyag izotrop, amit a továbbiakban feltételezünk, akkor ez a hőmérsékletfüggés egy egyszerű skaláris átskálázódás:

$$\tilde{\mathbf{g}}(T_2) = \Lambda(T_1, T_2)^2 \tilde{\mathbf{g}}(T_1), \quad \alpha(T) = \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \frac{\Lambda(T, T + \Delta T) - 1}{\Delta T}, \quad (4)$$

ahol utóbbi definiálja az α lineáris hőtágulási együtthatót. Következésképp, amikor a hőmérséklet időben változik egy anyagi pontban,

$$\dot{\tilde{\mathbf{g}}} = \left(\frac{d}{dT} \tilde{\mathbf{g}} \right) \dot{T} = 2\alpha(T) \dot{T} \tilde{\mathbf{g}} \quad (5)$$

írható a relaxált metrika együttmozgó időderiváltjára, (3) pedig a

$$\dot{\mathbf{A}} = \mathbf{L}\mathbf{A} + \mathbf{A}\mathbf{L}^T - 2\alpha\dot{T}\mathbf{A} \quad (6)$$

képletre bővül.

A képlékenyedés (ld. pl. a [19] monográfiát) a mi nyelvünkön szintén egy olyan jelenség, mely $\tilde{\mathbf{g}}$ változásához kötődik: elegendően erős mechanikai feszültség hatására a relaxált alak és metrika tartós változást szenved. Ezt a változást a

$$\tilde{\mathbf{Z}} = \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{g}}^{-1} \dot{\tilde{\mathbf{g}}}_{\text{plastic}} \quad (7)$$

képlékenyedési sebesség tenzorral jellemezhetjük, mellyel a teljes kinematikai fejlődési egyenlet

$$\dot{\mathbf{A}} = \mathbf{L}\mathbf{A} + \mathbf{A}\mathbf{L}^T - 2\alpha\dot{T}\mathbf{A} - 2\mathbf{Z}\mathbf{A}. \quad (8)$$

A továbbiakban a, $\|\mathbf{D}\| \ll 1 \Rightarrow \mathbf{A} = e^{2\mathbf{D}} \approx \mathbf{1} + 2\mathbf{D}$ kisdeformációs tartományra szorítkozunk, ahol (8) \mathbf{D} vezető rendjében a $2\dot{\mathbf{D}} = \mathbf{L} + \mathbf{L}^T - 2\alpha\dot{T}\mathbf{1} - 2\mathbf{Z}$ kifejezésre egyszerűsödik, mely az

$$\mathbf{L}^{\text{sym}} = \dot{\mathbf{D}} + \alpha\dot{T}\mathbf{1} + \mathbf{Z} \quad (9)$$

alakra rendezhető át ($^{\text{sym}}$ a szimmetrikus részt jelöli). Ezenfelül további céljainkhoz a hőtágulási együttható állandónak tételezhető fel.

A megnyúlások, deformációk referenciaidő-függő fogalmak, ezért nem objektív mennyiségek. Ezek (9) egyes tagjainak időintegráljaként értelmeződnek referencia-időtől pillanatnyi időig: a teljes megnyúlás a bal oldal időintegrálja, a rugalmas deformáció a jobb oldal első tagjáé, a hőtágulás a második tagé, a képlékeny deformáció pedig a harmadiké.

2. A TERMODINAMIKAI KERET A REOLÓGIA NÉLKÜL

Választott rugalmas konstitutív egyenletünk a Hooke-törvény:

$$\boldsymbol{\sigma} = E^{\text{dev}} \mathbf{D}^{\text{dev}} + E^{\text{sph}} \mathbf{D}^{\text{sph}}, \quad (10)$$

ahol a gömbi és deviatorikus komponensek és a rugalmasságtani együtthatók:

$$\mathbf{D}^{\text{sph}} = \frac{1}{3} (\text{tr} \mathbf{D}) \mathbf{1}, \quad \mathbf{D}^{\text{dev}} = \mathbf{D} - \mathbf{D}^{\text{sph}}, \quad E^{\text{sph}} = 3K, \quad E^{\text{dev}} = 2G. \quad (11)$$

Számunkra most E^{dev} és E^{sph} állandónak tételezhetőek fel. (10)-ből könnyű megmutatni [6], hogy a termorugalmasság klasszikus Duhamel–Neumann-képlete [20] speciális esetként adódik (a rugalmas deformáltság változóról a teljes megnyúlásra áttérve és fel-tételezve, hogy a referencia-időpontban nulla a rugalmas deformáltság, továbbá hogy képlékenyedés sem zajlik).

A kontinuum-termodinamika első főtétele, azaz a belső energia mérlege

$$\rho \dot{e} = -\nabla \cdot \mathbf{j}_e + \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{L}^{\text{sym}}), \quad (12)$$

ahol $e(\mathbf{D}, T)$ a fajlagos belső energia és \mathbf{j}_e az árama, mindkettő konstitutíve megadandó (és ρ a tömegsűrűség, mely állandó a kisdeformációs tartományban). Hasonlóan, a $s(\mathbf{D}, T)$ fajlagos entrópia mérlege

$$\rho \dot{s} = -\nabla \cdot \mathbf{j}_s + \sigma_s, \quad (13)$$

melyhez a legegyszerűbb és legszokásosabb $\mathbf{j}_s = \mathbf{j}_e/T$ feltételezéssel élünk a \mathbf{j}_s entrópiaáramra, s termodinamikailag konzistens kell legyen e -vel (vagyis a Gibbs-reláció fenn kell álljon köztük), és az entrópiaprodukció pozitív definit kell legyen: $\sigma_s \geq 0$. Konkretizálva, a

$$\mathbf{j}_e = \lambda \nabla \frac{1}{T} \quad (14)$$

Fourier-hővezetést választjuk pozitív λ hővezetési állandóval, és

$$e = cT + \left\{ \frac{E^{\text{dev}}}{2\rho} \text{tr} [(\mathbf{D}^{\text{dev}})^2] + \frac{E^{\text{sph}}}{2\rho} \text{tr} [(\mathbf{D}^{\text{sph}})^2] \right\} + \frac{E^{\text{sph}}}{\rho} T \alpha \text{tr} \mathbf{D}^{\text{sph}} \quad (15)$$

a belső energia kifejezése, ahol az első tag tartalmazza a c állandó fajhőt, a középső rész a tisztán rugalmas energia és a harmadik tag magyarázza a hőtágulás jelenségét. Az ehhez tartozó entrópiafüggvény egy additív konstans erejéig a következő:

$$s = c \ln \frac{T}{T_*} + \frac{E^{\text{sph}}}{\rho} \alpha \text{tr} \mathbf{D}^{\text{sph}}, \quad (16)$$

egy tetszőleges T_* segédkonstanssal. Az ezekből levezethető

$$\sigma_s = \mathbf{j}_e \cdot \nabla \frac{1}{T} + \frac{1}{T} \text{tr}(\boldsymbol{\sigma} \mathbf{Z}) = \mathbf{j}_e \cdot \nabla \frac{1}{T} + \frac{E^{\text{dev}}}{T} \text{tr}(\mathbf{D}^{\text{dev}} \mathbf{Z}) + \frac{E^{\text{sph}}}{T} \text{tr}(\mathbf{D}^{\text{sph}} \mathbf{Z}) \quad (17)$$

entrópiaprodukcióban az első tag nemnegatív (14) miatt, a továbbiak pozitív definit-ségét pedig a

$$\mathbf{Z} = \Gamma \dot{\mathbf{D}}^{\text{dev}}, \quad \Gamma = \gamma H \left(\text{tr} \left[(\mathbf{D}^{\text{dev}})^2 \right] - \frac{2}{3} D_{\text{crit}}^2 \right) \cdot H \left(\text{tr}(\mathbf{D}^{\text{dev}} \dot{\mathbf{D}}^{\text{dev}}) \right) \quad (18)$$

képlékeny konstitutív összefüggéssel biztosítjuk, ahol γ és D_{crit} pozitív állandók, H pedig a Heaviside-függvény.

A (18) választás egy standard képlékenyedésméletet fogalmaz meg:

- a képlékenyedési sebesség arányos a deviatorikus rugalmas sebességgel,
- a folyási feltétel a von Mises-féle (vegyük észre, hogy most a feszültség Hooke-féle kapcsolatban van a rugalmas deformáltsággal, tehát \mathbf{D} helyett szabadon helyettesíthetjük be $\boldsymbol{\sigma}$ -t, így D_{crit} ekvivalens egy von Mises-féle σ_{crit} határfeszültséggel),
- a képlékeny változás leáll tehermentesítés során, a második Heaviside-szorzó révén, mellyel a $\sigma_s \geq 0$ termodinamikai követelményt biztosítjuk.

Megjegyezzük, hogy hőmérsékletfüggő E^{sph} , E^{dev} , α , c együtthatók esetén, általánosabb rugalmasenergia-kifejezés esetén, nagy deformációk esetén ill. anizotrop közegek esetén hasonló, csak némileg bonyolultabb képletek vezethetők le ugyanezzel a módszertannal.

A hőmérséklet változását meghatározó egyenlet (15)-ből vezethető le (12), (10) és (9) behelyettesítésével:

$$\rho c \dot{T} = -\nabla \cdot \mathbf{j}_e - E^{\text{sph}} \alpha T \text{tr} \dot{\mathbf{D}}^{\text{sph}} + E^{\text{dev}} \text{tr}(\mathbf{D}^{\text{dev}} \mathbf{Z}). \quad (19)$$

Itt a jobb oldal első tagja a hőhatásról ad számot. A második tag a szilárd anyagok Joule–Thomson-jelenségét okozza: hűlést nyújtás és melegedést összenyomás esetén. Ez egy reverzibilis változástípus, a hőtágulás egy kevésbé nyilvánvaló, de elkerülhetetlen megnyilvánulási formája. A harmadik tag ellenben, nemnegatív lévén, egy irreverzibilis jelenség – az entrópiaprodukció nemnegatív voltának egy következménye –, így mindig melegedést okoz, amikor csak képlékeny változás is zajlik.

A fenti mérleg- és konstitutív egyenletekhez hozzávéve a

$$\rho \dot{\mathbf{v}} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (20)$$

mechanikai mozgásegyenletet, vagy ennek (a továbbiakban alkalmazott)

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{0} \quad (21)$$

erőegyensúlyi közelítését, egy zárt dinamikai egyenletrendszerhez jutunk. Így tehát minden konkrét folyamatot ki tudunk számolni, ha rendelkezésre áll a szükséges mennyiségű kezdeti és peremfeltétel.

3. EGYTENGELYŰ FOLYAMATOK – KÉPLETEK ÉS KÍSÉRLETI SZEMLÉLTETÉSÜK

Az előállt elméleti keret alkalmazhatóságát egytengelyű folyamatokon mutatjuk be. Az ilyen esetek két okból nevezeteseek: könnyű velük számolni, és számos kísérlet eredményeit képesek leírni. Ilyen speciális geometriájú testekre, és adiabatikusságot és szimmetriaőrző peremfeltételeket feltételezve, minden mennyiség eloszlása homogén. Más szóval, a mennyiségek időfüggőek, de helyfüggetlenek. Alkalmas koordinátarendszert választva, a tenzoroknak csak longitudinális (\parallel) és transzverzális (\perp) komponenseik lehetnek:

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma^{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} D^{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & D^{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & D^{\perp} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} \varepsilon^{\parallel} & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon^{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon^{\perp} \end{pmatrix} \text{ stb.} \quad (22)$$

Következésképp, a deviatorikus és gömbi részek – a \mathbf{D} tenzor példáján mutatva:

$$\mathbf{D}^{\text{dev}} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 2(D^{\parallel} - D^{\perp}) & 0 & 0 \\ 0 & -(D^{\parallel} - D^{\perp}) & 0 \\ 0 & 0 & -(D^{\parallel} - D^{\perp}) \end{pmatrix}, \quad (23)$$

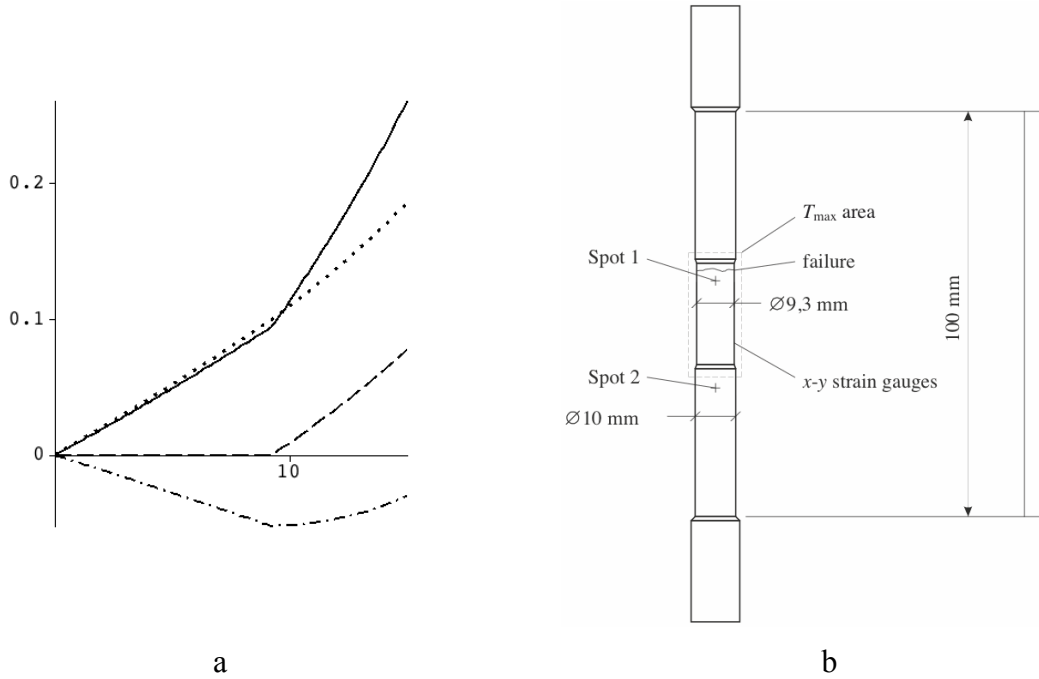
$$\mathbf{D}^{\text{sph}} = \frac{1}{3} \begin{pmatrix} D^{\parallel} + 2D^{\perp} & 0 & 0 \\ 0 & D^{\parallel} + 2D^{\perp} & 0 \\ 0 & 0 & D^{\parallel} + 2D^{\perp} \end{pmatrix}. \quad (24)$$

Tekintsünk mechanikai egyensúlyi kezdeti feltételt: $\mathbf{D}(t_0) = \mathbf{0}$ a t_0 kezdeti időben – amikor, természetesen, képlékeny változás sincs: $\mathbf{Z}(t_0) = \mathbf{0}$, és a tisztán rugalmas feszültség nulla –, és jelölje T_0 a kezdeti hőmérsékletet. Az $\boldsymbol{\varepsilon}$ teljes megnyúlás – melyet kísérletekben mérni tudunk –, mint korábban említettük, \mathbf{L}^{sym} t_0 -tól vett időintegrálja, tehát kezdetben szintén nulla. Véges differenciás numerikus szemszögből tekintve a megoldás a következőképpen határozható meg. Tekintsünk erővezérelt folyamatot, ahol $\sigma^{\parallel}(t)$ van előírva (figyelembe véve, hogy a kisdeformációs tartományban a keresztmetszet változása elhanyagolható). [Nyúlásvezérelt folyamat esetén egy hasonló, de némileg rafináltabb sémára van szükség.] Fontos konstatálni, hogy az itt vázolt véges-differencia-séma egyszerűsége ellenére is alkalmas demonstrálni, hogy az egyenletrendszer egyértelműen megoldható. Emellett számos szilárdtestmechanikai alkalmazásban elegendő az általa nyújtott pontosság közepesen kis időlépésekre is.

Ha t ideig minden mennyiséget ismerünk, az előírt $\sigma^{\parallel}(t + \Delta t)$ -ből, mely tulajdonképpen $\boldsymbol{\sigma}(t + \Delta t)$ ismeretét jelenti, (10)-ből meghatározzuk $\mathbf{D}(t + \Delta t)$ -t. Ezután,

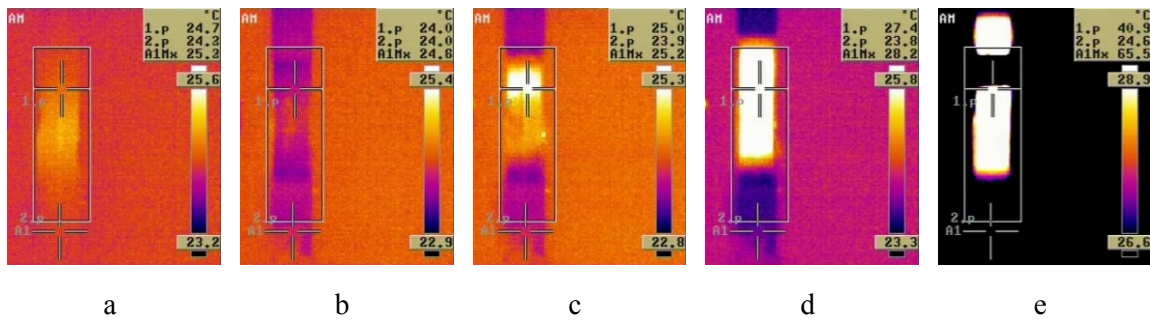
$[\mathbf{D}(t + \Delta t) - \mathbf{D}(t)]/\Delta t$ -t $\dot{\mathbf{D}}$ egy közelítéseként használva a $[t, t + \Delta t]$ intervallumon, (18) alkalmazásával \mathbf{Z} kiadódik erre az intervallumra. Ezt követően (19) \dot{T} -re ad jóslatot, amely $T(t + \Delta t)$ -t nyújtja, továbbá lehetővé teszi, hogy meghatározzuk $\mathbf{L}^{\text{sym}} = \dot{\boldsymbol{\epsilon}}$ -t (9)-ből, így végül előáll $\boldsymbol{\epsilon}(t + \Delta t)$ (mely adat kísérleti adatokkal való összevetéshez hasznos).

Ha egy minta a tekintett kezdeti feltételekből, azaz relaxált és egyensúlyi állapotból indul, majd növekvő erővel nyújtják, az elmélet a következő kvalitatív viselkedést jósolja (ld. az 1a. ábrát). A képlékenyedési küszöb alatt a Joule–Thomson-jelenség jól megfigyelhető, és a csökkenő hőmérséklet némi negatív hőtágulást eredményez, mely részben csökkenti a rugalmas megnyúlást. Amikor a képlékenyedés belép, hozzájárul a teljes megnyúláshoz, továbbá a vele járó disszipáció a hőmérsékletet is növelni kezdi.



1. ábra. (a) Az egyes megnyúlásfajták és a hőmérséklet az idő függvényében, növekvő erővel történő egytengelyű nyújtás esetén (jelleggörbék az elmélet alapján). A hőmérséklet (pont-szaggatott vonal) eleinte csökken – egy adiabatikusan táguló gázhoz hasonlóan – majd növekedni kezd – a képlékeny disszipáció miatt –, a rugalmas megnyúlás (pontosított vonal) a növekvő feszültséget követve növekszik, a képlékeny megnyúlás (szaggatott vonal) csak a kritikus feszültség felett jelenik meg, ezzel hozzájárulva a teljes megnyúlás (folytonos vonal) növekedéséhez. (b) A kísérleti minták vázlata. A középső szakasz kikeskenyített, és ezt a tartományt egy termokamera filmezi. Két kiszemelt pont hőmérsékletét és a figyelt tartomány maximális hőmérsékletét numerikusan is kijelzi.

Ezek a fázisok szépen bemutathatóak kísérletileg, ha a folyamat során a hőmérsékletet is figyeljük. Öt pillanatfelvételt mutatunk be, melyeket egy termokamera rögzített egy poliamid-6 műanyag mintán elvégzett húzókísérlet (ld. 1b. ábra) során, e felvételek az egyes fontos stációkat ábrázolják (ld. 2. ábra). Az utolsó fázist, a tönkremenetelt az itt bemutatott elmélet még nem tudja leírni, de eddigi tanulmányok alapján [9][10] szintén beilleszthetőnek tűnik majd a termodinamikai tárgyalásmódba. A tönkremenetelt ugyanis egy termodinamikai stabilitásvesztés magyarázhatja.



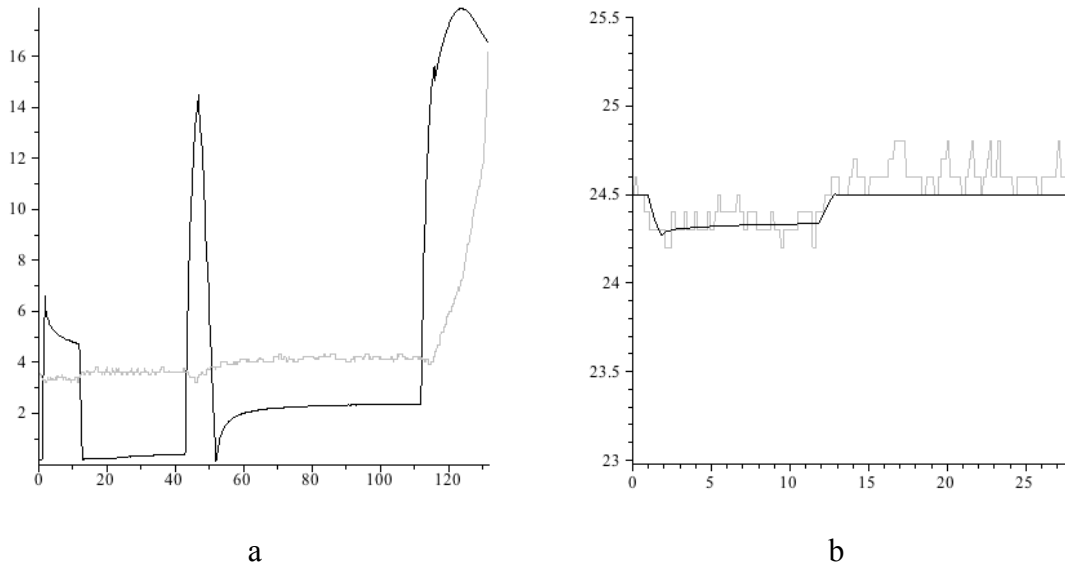
2. ábra. Hőkamera pillanatfelvételei. Az első mutatja a kiindulási állapotot (a), ezután a kvázi-adiabatikus hűlés figyelhető meg (b), majd hődisszipáció lép fel a képlékenyedés megindulása miatt (c), később a képlékeny változás a teljes ki-
keskenyített tartományra kiterjed (d), végül a minta elszakad (e).

Ugyanezek a jellegzetességek figyelhetők meg a 3a. ábrán, ahol egy ugyanilyen mintán mért feszültség- és hőmérsékletértékek vannak ábrázolva az idő függvényében. Ez alkalommal két felterhelési-leterhelési ciklust alkalmaztunk, a másodikat magasabb feszültségértékig vittük el, de még garantáltan a folyáshatár alatt maradván. A harmadik felterhelést tönkremenetelig vittük el, átkelve közben a képlékeny szakaszon. Ennek megfelelően az első két ciklus során a hőmérséklet esik egy kicsit, majd visszaemelkedik. A harmadik ciklus szintén hűléssel kezdődik, majd a képlékenyedés beindulásakor (ld. a kis tranzienszt a feszültséggörbén) a disszipáció megindul és dominálni kezd, hőmérsékletemelkedést eredményezve. A (18)–(19) egyenleteknek megfelelően [ill. lásd hamarosan a (25) egyenletet is] a hűlési szakaszok a terhelés függvényében lineárisak, a melegedési szakasz pedig kvadrátikus/parabolikus.

A 3b. ábrán az első fel- és leterhelési szakaszon felnagyítva látható a mért hőmérsékletfutás és a rá adott elméleti jóslat, utóbbit a

$$\rho c \dot{T} = -\alpha T \dot{\sigma} \quad (26)$$

képlet alapján számolva, mely (19)-ből következik, ha nincs képlékeny változás és hőforgalom. A számításhoz a $\rho = 1150 \text{ kg/m}^3$, $c = 1700 \text{ J/(kg K)}$, $\alpha = 0,8 \cdot 10^{-6} \text{ 1/K}$ irodalmi értékeket használtuk. A méréssel való jó egyezés jelzi, hogy az elmélet jól teljesít, és az alkalmazott közelítések jogosak.



3. ábra. (a) A mért feszültség (fekete vonal) és hőmérséklet (szürke vonal) az idő függvényében, két – rugalmas tartományban maradó – nyújtás-visszaengedés, majd egy képlékenyedésig és szakadásig elvitt felterhelés során. (b) Mért (szürke) és jószolt (fekete) hőmérséklet az első terhelési ciklus alatt.

Alaposabb szemrevételezéssel megfigyelhetjük, hogy egy fel-leterhelési ciklus végén a hőmérséklet nem pontosan a kezdő értékre tér vissza, hanem egy kicsit megemelkedik. Ez a megemelkedés a második, magasabb terhelési ciklus során nagyobb. A képlékenyedést kizárhatjuk e disszipáció okaként. Zajlik azonban egy másik viselkedésfajta, a reológia is a szilárd anyagokban. A következő szakaszban bemutatjuk, hogy a kísérleti eredmények hogyan teszik szükségessé a reológia hozzáadását az elmülethez, ez hogyan tehető meg irreverzibilis termodinamika módszertanunkkal, hogyan határozhatók meg a reológiai együtthatók a kísérleti adatokból, és hogy a reológia nemcsak a mechanikai viselkedést módosítja, hanem a hőmérséklet alakulásához is egy további disszipációforrásként jelentkezik.

4. A REOLÓGIA TERMODINAMIKAI BEVEZETÉSE

A reológia termodinamikai megfogalmazása belső változók (konkrétabban: dinamikai szabadsági fokok [21]) segítségével tehető meg. A hőtágulás és képlékenyedés nélküli egyszerűbb esetre a módszertant a [12] munka ismertette. Mi itt ezt fogjuk kiterjeszteni, hőtágulást és képlékenyedést is megengedve. A [12]-belihez hasonló részleteket csak tömören ismételjük meg, a különbségekre fogunk fókuszálni.

A módszertan szerint egy további mennyiség létét tételezzük fel, melyet szimmetrikus tenzorként keresünk, annak megfelelően, hogy a reológia elsősorban a mechanikai viselkedésben jelentkezik, egy további feszültségforrásként – gondoljunk például egy belső csillapító erőre. A feszültség általánosításán túl azt is feltételezzük, hogy a fajlagos entrópia, mely eddig megadható volt \mathbf{D} és e függvényeként, most ettől a ξ új mennyiségtől is függ, egy kvadratikusan additív tag formájában, mely biztosítja, hogy termikus egyensúlyban az entrópia továbbra is maximális, a második főtételnek megfelelően. Azaz

$$s(\mathbf{D}, e, \xi) = s_{\text{eddigi}}(\mathbf{D}, e) - \frac{1}{2} \text{tr} \xi^2. \quad (27)$$

Ennek az együtmozgó időderiváltját képezve azt találjuk, hogy (17)-en túlmenően az entrópiaprodukciónak két extra tagot kap:

$$\frac{1}{T} \text{tr}(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \mathbf{L}^{\text{sym}}) - \varrho \text{tr}(\xi^2), \quad (28)$$

ahol $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ jelöli a reológiai eredetű feszültségjárulékot. E többlet-entrópiaprodukciónemnegativitásának Onsager-féle biztosításaként a következő összefüggéseket tételezzük fel:

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{dev}} &= l_{11}^{\text{dev}} \mathbf{L}^{\text{sym}} + l_{12}^{\text{dev}} (-\varrho T \xi^{\text{dev}}), & \hat{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{sph}} &= l_{11}^{\text{sph}} \mathbf{L}^{\text{sym}} + l_{12}^{\text{sph}} (-\varrho T \xi^{\text{sph}}), \\ \xi^{\text{dev}} &= l_{21}^{\text{dev}} \mathbf{L}^{\text{sym}} + l_{22}^{\text{dev}} (-\varrho T \xi^{\text{dev}}), & \xi^{\text{sph}} &= l_{21}^{\text{sph}} \mathbf{L}^{\text{sym}} + l_{22}^{\text{sph}} (-\varrho T \xi^{\text{sph}}) \end{aligned} \quad (29)$$

a pozitív definit

$$\begin{pmatrix} l_{11}^{\text{dev}} & l_{12}^{\text{dev}} \\ l_{21}^{\text{dev}} & l_{22}^{\text{dev}} \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} l_{11}^{\text{sph}} & l_{12}^{\text{sph}} \\ l_{21}^{\text{sph}} & l_{22}^{\text{sph}} \end{pmatrix} \quad (30)$$

együtthatómátrixokkal. Megjegyzendő, hogy megengedhetnénk onsageri csatolódást (17) tenzori, képlékenyedéssel kapcsolatos részéhez is. Mindazonáltal jelenlegi céljainkra az általánosság eme szintje elegendő lesz. Azt fogjuk ugyanis találni, hogy az itt mutatott kísérleti adatok reológiai vonatkozásait ez az egyszerűbb keret is már sikeresen magyarázza.

A továbbiakban a képlékeny küszöb alatti folyamatokat tekintünk. Ezenkívül elhanyagoljuk (9)-ben a kis hőtágulási részt, amely a 3. ábrán látottakhoz hasonló kis hőmérsékletváltozásokhoz tartozik. Ekkor a

$$\dot{\mathbf{D}} = \mathbf{L}^{\text{sym}} = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} \quad (31)$$

közelítésbe jutunk. Ezzel párhuzamosan, a lényegében állandó abszolút hőmérséklet mellett az l együtthatók konstansnak tekinthetők, és ekkor ξ kiküszöbölhető a (29) egyenletrendszerből. Az eredmény

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^{\text{dev}} + \tau^{\text{dev}} \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{dev}} &= E_0^{\text{dev}} \mathbf{D}^{\text{dev}} + E_1^{\text{dev}} \dot{\mathbf{D}}^{\text{dev}} + E_2^{\text{dev}} \ddot{\mathbf{D}}^{\text{dev}}, \\ \boldsymbol{\sigma}^{\text{sph}} + \tau^{\text{sph}} \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{sph}} &= E_0^{\text{sph}} \mathbf{D}^{\text{sph}} + E_1^{\text{sph}} \dot{\mathbf{D}}^{\text{sph}} + E_2^{\text{sph}} \ddot{\mathbf{D}}^{\text{sph}} \end{aligned} \quad (32)$$

a teljes feszültségre, ahol az új szorzók a korábbi l együtthatók egyszerű kombinációi. Amit kaptunk, az két független lineáris reológiai modell, mely $\boldsymbol{\sigma}$, $\dot{\boldsymbol{\sigma}}$, \mathbf{D} , $\dot{\mathbf{D}}$, $\ddot{\mathbf{D}}$ tagokat tartalmaz. Eszerint a klasszikus Kelvin–Voigt-, Maxwell- és Jeffrey-modell mind speciális esete az ilyen ún. Kluitenberg–Verhás-modelleknek (az elnevezés eredetét és további analízist ld. [12]-ben). E reológiai modellek termodinamikai származtatásának egyik fontos haszna, hogy a második főtételből megszorító feltételek derülnek ki a (32)-beli együtthatókra (mely feltételek nem mások, mint a (30) mátrixok pozitív definitése, lefordítva ezekre az új együtthatókra – az egyszerű levezetést ld. [12]-ben). E feltételek némelyike nemtriviális és figyelemre méltó:

$$\begin{aligned} \tau^{\text{dev}} \geq 0, \quad E_0^{\text{dev}} \equiv E^{\text{dev}} \geq 0, \quad E_1^{\text{dev}} \geq \tau^{\text{dev}} E_0^{\text{dev}}, \quad E_2^{\text{dev}} \geq 0, \\ \tau^{\text{sph}} \geq 0, \quad E_0^{\text{sph}} \equiv E^{\text{sph}} \geq 0, \quad E_1^{\text{sph}} \geq \tau^{\text{sph}} E_0^{\text{sph}}, \quad E_2^{\text{sph}} \geq 0. \end{aligned} \quad (33)$$

5. A REOLÓGIAI EGYÜTTHATÓK MEGHATÁROZÁSA KÍSÉRLETI ADATOKBÓL

Kísérletileg mért feszültség- és megnyúlásadat okból a τ , E_i konstansok meghatározhatóak. Ehhez az első lépés a \mathbf{D} és $\boldsymbol{\varepsilon}$ közti különbség kezelése. Egy kísérletben \mathbf{D} nem feltétlenül indul nulláról – általában szükség van valamennyi előfeszítésre a megfelelően egytengelyű kezdeti állapot biztosításához –, és a nyúlásmérő bélyegek (vagy más nyúlásmérő eszközök) adatai is sokszor egy nemnulla értékről indulnak a kísérlet kezdő pillanatában. E körülmények legegyszerűbb (és sokszor megkerülhetetlen) kezelése az, ha nem kézi nullázásokat hajtunk végre, hanem elfogadjuk, hogy \mathbf{D} és $\boldsymbol{\varepsilon}$ kezdeti értéke között egy $\boldsymbol{\delta}$ eltolódás van:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}^{\text{dev}} + \tau^{\text{dev}} \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{dev}} &= \boldsymbol{\delta}^{\text{dev}} + E_0^{\text{dev}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{dev}} + E_1^{\text{dev}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{dev}} + E_2^{\text{dev}} \ddot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{dev}}, \\ \boldsymbol{\sigma}^{\text{sph}} + \tau^{\text{sph}} \dot{\boldsymbol{\sigma}}^{\text{sph}} &= \boldsymbol{\delta}^{\text{sph}} + E_0^{\text{sph}} \boldsymbol{\varepsilon}^{\text{sph}} + E_1^{\text{sph}} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{sph}} + E_2^{\text{sph}} \ddot{\boldsymbol{\varepsilon}}^{\text{sph}}. \end{aligned} \quad (34)$$

A konkrét δ értékek tehát nem hordoznak semmi elvi információt, nem anyagi vagy más fontos mennyiségek, hanem egyszerűen a kísérleti körülmények egy technikai jellemzője.

A következő lépés annak felismerése, hogy egytengelyű kísérletekben az ε^\perp keresztirányú nyúlás értékek mérése nagyfontosságú. Igaz ugyan, hogy egytengelyű folyamatokra lehetséges [12] (34)-ből egy összefüggést állítani fel σ^\parallel és ε^\parallel között. A kapott összefüggés azonban deriváltakat is tartalmaz, σ^\parallel harmadik és ε^\parallel negyedik deriváltja rendjéig, és helyet kap benne mind a nyolc τ , E_i konstans. Mind a konstansok nagy száma és az ilyen magas deriváltak diszkrét kísérleti adatsorokból történő előállítása olyan magas hibával jár, mely komoly gyakorlati nehézségeket jelent. Ráadásul még ha sikerülne is a σ^\parallel és ε^\parallel közti összefüggés együtthatóit nagy pontossággal előállítani, a τ , E_i konstansokra való invertálás is problematikus, tekintve köztük fennálló nemlineáris összefüggéseket. Kulcsfontosságú tehát, hogy megbízható ε^\perp értékek is rendelkezésünkre álljanak, melyek segítségével kiszámolhatjuk a deviatorikus és gömbi részeket és így két független illesztési problémára redukáltuk a feladatot, ahol mindkettőben csak 4 együtthatót kell meghatározni.

A (34) egyenletek lineárisak az ismeretlen paraméterekben, tehát egy legkisebb négyzetes illesztés kivitelezhetőnek tűnik, ahol az adatpontok diszkrét sok pillanatban állnak rendelkezésre, és a deriváltakat is ezekből az adatokból származtatnánk. A harmadik elébünk álló nehézség az, hogy egy ilyen adatsorból már az első és második deriváltak származtatása is problémás, már akkor is, ha maguk a mért adatok hibája kicsi: ezek a hibák nagymértékben felerősödnek differenciák képzésekor, és az illesztett együtthatók nagymértékben megbízhatatlannak bizonyulnak. Az eljárás, melyet a 3a. ábrán látottakhoz hasonló adatsorok esetére kidolgoztunk, a következő.

Valamilyen simítást szeretnénk végrehajtani. Ezért, ahelyett, hogy egy (34) típusú egyenletet közvetlenül használnánk fel, tekintsük egy időintegrálját. Közelebbről, az t időpontra felírt egyenletet megszorozzuk egy t középső ablakfüggvénnyel, és a szorzatot integráljuk. Az újdonság az, hogy olyan $w(t)$ ablakfüggvényt választunk, mely csak egy $[t_1, t_2]$ intervallumban nemnulla, és a két végpontban olyan simán tart nullához, hogy még első és második deriváltja is nullához tart. Ennek az az előnye, hogy a deriváltakat tartalmazó tagokon úgy hajthatunk végre parciális integrálást, hogy a felületi tagok nullák lesznek, pl.

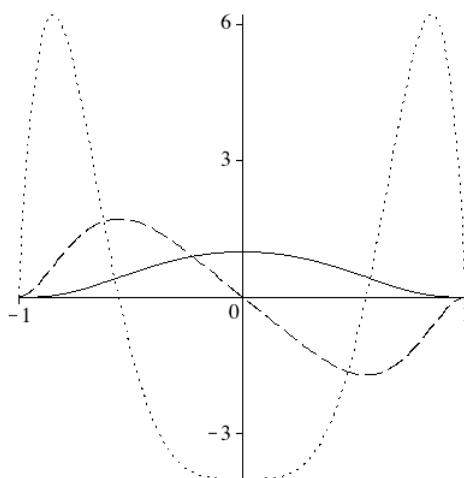
$$\int_{t_1}^{t_2} \dot{\sigma}^\parallel(t) w(t) dt = [\sigma^\parallel(t) w(t)]_{t_1}^{t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \sigma^\parallel(t) \dot{w}(t) dt = - \int_{t_1}^{t_2} \sigma^\parallel(t) \dot{w}(t) dt. \quad (35)$$

Ezzel az eljárással a deriváltak integráljait az eredeti függvények integráljaira vezethetjük vissza (ahol az ablakfüggvény első vagy második deriváltjával vannak összeintegrálva, melyek még szintén szép simán viselkednek). Ezt a trükköt a disztribúcióelmélet ún. tesztfüggvényei motiválták. Gyors és kényelmes számítások céljából w -t polinom-

ként kerestük, és némi kísérletezés után a $[-1, 1]$ intervallum szélein elegendően gyorsan eltűnő (ld. 4. ábra), a teszteken jól teljesítő

$$p(u) = (u + 1)^3(u - 1)^3(u^2 + 1) \quad (36)$$

polinomot választottuk. Ezután tetszőleges $[t_1, t_2]$ intervallumokhoz átskáláztuk a változóját. Legalább öt különböző intervallumot választunk, és az integrált értékekre végzünk el legkisebb négyzetes illesztést.



4. ábra. (a) Az ablakfüggvény (fekete vonal) és első (szaggatott vonal) és második (pontosított vonal) deriváltja. Láthatóan mindhárom függvény elegendően egyenletesen vesz mintát az intervallumból (az intervallum semelyik rész sincs különösebben előnyben részesítve más részekhez képest).

Az adatsorok integráljai numerikusan lettek kiszámolva, de itt is javítani akartuk a számítás jóságát. Ennek oka az, hogy a gyakorlatban sokszor csak pár tucat adatpont áll rendelkezésünkre. Legalább öt különböző intervallumra van szükség az öt ismeretlen konstans meghatározásához, de ha hibát is szeretnénk az illesztett értékekhez rendelni (mégpedig valami informatív, hiteles szinten), legalább hét intervallum ajánlatos. Ekkor a numerikus integráloknak meglehetősen megbízhatóknak kell lenniük, mert értékeik nem fognak nagyon eltérni egymástól, így fennáll a numerikus megbízhatatlanság veszélye.

E célból módosítottuk a numerikus integrálás klasszikus trapézsabályát. A trapézsabály ugyanis az integrandust (szakaszonként) lineáris függvénnyel közelíti. A mi esetünkben azonban egy szorzatot kell integrálni, és ablakfüggvényünk második deriváltja már elkerülhetetlenül elég gyorsan változik. Ez már önmagában jelentősen ér-

vényteleníti a (szakaszonkénti) lineáris közelítést. Ezért az ötlet az, hogy csak magát az adatsort közelítsük lineáris szakaszokkal, az ablakfüggvényt (ill. megfelelő deriváltját) viszont egzaktul vesszük figyelembe. Így például

$$\int_{t_a}^{t_b} \sigma^{\parallel}(t) w(t) dt \approx \int_{t_a}^{t_b} \left[\sigma^{\parallel}(t_a) + \frac{\sigma^{\parallel}(t_b) - \sigma^{\parallel}(t_a)}{t_b - t_a} (t - t_a) \right] w(t) dt, \quad (37)$$

melynek kiszámítása $w(t)$ és $tw(t)$ integráljára vezethető vissza, amiket egzaktul határozhatunk meg.

Mindezen előkészületek után a 3a. ábrához hasonló adatsorok feldolgozhatónak bizonyulnak. Reológiai konstansok céljára a folyamatok olyan szakaszai a leginformatívabbak, ahol gyors változás történik, így a második deriváltakra is megbízható információt kapunk. Demonstrációs célból most a 3a. ábra első fel-leterhelésének egy kis részére illesztünk: a felterhelés végére és a leterhelés elejére. A terhelésből visszaterhelésbe történő meredek váltást kockázatosnak tűnhet felhasználni, de igazából az ilyen erősen változó szakaszok nyújtanak a legtöbb információt a deriváltas tagokról, az integrálos simítás pedig intelligensen kezeli a vadul változó szakaszokat.

A legkisebb négyzetes illesztés módszere hibaszámítást is biztosít, és az illeszkedés jószágát jellemző R^2 érték is számolható, de mindemellett az a legjobb, ha az illesztés jósága vizualizálható is.. E célból, az egyszerű

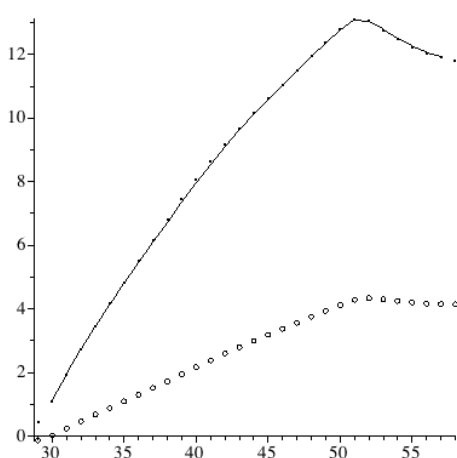
$$\begin{aligned} \sigma_n^{\text{sph}} + \tau^{\text{sph}} \frac{\sigma_n^{\text{sph}} - \sigma_{n-1}^{\text{sph}}}{\Delta t} &= \delta^{\text{sph}} + E_0^{\text{sph}} \varepsilon_n^{\text{sph}} \\ &+ E_1^{\text{sph}} \frac{\varepsilon_n^{\text{sph}} - \varepsilon_{n-1}^{\text{sph}}}{\Delta t} + E_2^{\text{sph}} \frac{\varepsilon_{n+1}^{\text{sph}} - 2\varepsilon_n^{\text{sph}} + \varepsilon_{n-1}^{\text{sph}}}{\Delta t^2} \end{aligned} \quad (38)$$

numerikus sémát megoldva σ_n^{sph} -re, jósolt σ^{sph} értékeket számítottunk a kísérleti ε^{sph} adatok és egy kezdeti σ^{sph} érték segítségével (és a deviatorikus résznél ugyanígy jártunk el). Ennek az előrelépő sémának előnye, hogy akkor is megbízhatóan alkalmazható, ha az illesztett együtthatók némelyike kicsi, vagy *a priori* nulla.

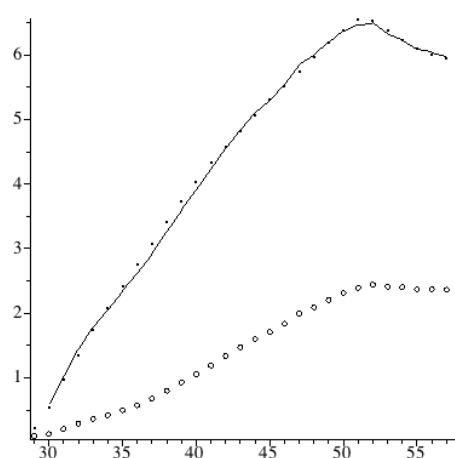
Ahogy már említettük, a teljes folyamatnak csak egy kicsi szakaszát analizáljuk itt, hogy éles helyzetben lássuk és láttassuk numerikus eljárásunk teljesítőképességét. Harminc adatpontot használunk, és hét intervallumra integrálunk. Ennélfogva mindegyik intervallum hat pontból áll. (A szomszédos intervallumok között két pontnyi átfedés van.) Nyilvánvaló, hogy hat pont egy intervallumnak elég durva diszkretizációját jelenti, tehát a helyzet valóban elég éles. Az illesztéssel kapott együtthatókat és az általuk jósolt folyamatszakaszt az alábbi táblázatban és ábrán láthatjuk.

anyagi paraméter	illesztett érték	standard hiba
τ^{dev} [s]	0,3600	$\pm 0,0659$
E_0^{dev} [Gpa]	0,8612	$\pm 0,0556$
E_1^{dev} [Gpa·s]	0,4724	$\pm 0,0686$
E_2^{dev} [Gpa·s ²]	0,0029	$\pm 0,0010$

anyagi paraméter	illesztett érték	standard hiba
τ^{sph} [s]	0,2329	$\pm 0,0904$
E_0^{sph} [Gpa]	4,5708	$\pm 1,0392$
E_1^{sph} [Gpa·s]	1,8566	$\pm 0,4401$
E_2^{sph} [Gpa·s ²]	0,0013	$\pm 0,0220$



deviatorikus rész



gömbi rész

5. ábra. Táblázat: az illesztéssel nyert reológiai együtthatók és hibáik. Görbék: az együtthatók alapján számolt elméleti jóslat (folytonos vonal) illeszkedése a mért értékekre (pontok). Tájékoztatóképpen ábrázolásra került a relatív nyúlás mért adatsora is, alkalmas átskálázásban (üres körök).

A kapott reológiai együtthatókra számos további ellenőrzés végezhető el. Először is megnyugtatóan azt találjuk, hogy a (33) termodinamikai feltételek valóban teljesülnek. Másodszor, a E_0^{dev} , E_0^{sph} rugalmasságtani együtthatók lehetővé teszik a Poisson-tényező és a Young-modulus meghatározását (ld. [12], Függelék). Előbbire az így adódó 0,37 érték szépen egyezik a 0,38 irodalmi adattal. A Young-modulus (1,2 GPa) a tipikus irodalmi értéktartomány (1,9 GPa ~ 3,3 GPa) alá esik, de erről az együtthatóról tudható, hogy erősen függ a páratartalomtól (ezért olyan széles az irodalmi értéktartomány). Emellett azt sem szabad elfelejteni, hogy a Young-modulus szokásos mérése véges felterhelési sebesség mellett történik, és a longitudinális feszültség–nyúlás-görbét a reológia alaposan befolyásolja. Így például már a legegyszerűbb reológiai szituációban, egy

deviatorikus Kelvin–Voigt-modell és gömbi Hooke-modell esetén az eredő egytengelyű egyenletben nemcsak σ^{\parallel} és ε^{\parallel} , hanem első deriváltjaik is szerepelnek ([12], Függelék). E deriváltak hányadosa, $\dot{\sigma}^{\parallel}/\dot{\varepsilon}^{\parallel}$ dominálja a longitudinális feszültség–nyúlás-görbét a terhelés kezdeti szakaszán és, nem túl lassú terhelések esetén, a további részt is. Másszóval, e deriváltak együtthatóinak hányadosa (szisztematikus jelöléssel, $E_1^{\parallel}/\tau_1^{\parallel}$) egy dinamikai Young-modulus szerepét játssza. Namármost, a fent kapott reológiai együtthatókkal ez a dinamikai Young-modulus 1,47 GPa-nak bizonyul, mely 24%-kal magasabb a statikusnál. Megjegyezzük, hogy (33) következményeképp a dinamikai Young-modulus mindig nagyobb a statikusnál [12]. Bonyolultabb reológiák – mint az itt bemutatott műanyagé – esetén magasabbrendű dinamikai Young-modulusok (magasabb deriváltak együtthatóinak hányadosai) is jelen vannak. A másodrendű Young-modulus például az itt bemutatott esetben már 1,84 GPa.

A szilárdtest-reológia egy általános figyelmeztetése, hogy a Young-modulus szokásos, a feszültség–nyúlás-görbéből származtatása hibásan magas értékekre vezethet, ha reológiát elhanyagoljuk. Felhívjuk a figyelmet, hogy reológiával nemcsak műanyagok [22] és hasonló anyagok esetén találkozhatunk: így például a közetek mechanikai leírása szintén a teljes (34) reológiai modellpárt igényli (ld. [23][24][25]).

6. DISZKUSSZIÓ

Az itt felállított elmélet elég gazdag hozzá, hogy megragadja a szilárd anyagok rugalmas, hőtágulási, reológiai és képlékeny aspektusait. Mindazonáltal ezek mindegyikét a lehető legegyszerűbb konkrét kinematikai és konstitutív választások esetén mutattuk be, hogy megkönnyítsük a kísérleti adatokkal való összevetést. Ezek a választások jól vizsgáltak az itt bemutatott mérési adatokkal való összehasonlítás során. Ennek ellenére az elmélet sokkal általánosabb folyamatokat és anyagi viselkedéseket is le tud írni, mint a nagydeformációs folyamatok, anyagi anizotrópia, nemlineáris rugalmasság, kifinomultabb képlékenyedési viselkedések, és mindezek nemkonstans rugalmasságtani, hőtágulási, reológiai és más együtthatókkal.

Az elmélet jövőben kivitelezhető általánosításait illetően először is a képlékeny és reológia onsageri csatolása említendő meg. Másodszor, a nem-Fourier-hővezetés szintén beilleszthető, egyesítve a merev hővezetőkre alkalmazott belső változós eljárást [11] az itt bemutatott termomechanikai oldallal. A tönkremenetel ugyanilyen termodinamikai módszertannal történő bevezetése – a [9][10] előfutár munkákra támaszkodva – egy távolabbi, de szintén ésszerű jelölt.

A kísérleti oldalon, célunk itt az volt, hogy példákat mutassunk az egyes szóba kerülő jelenségekre. Ezek az aspektusok, mint például a Joule–Thomson-jelenség és a Kluitenberg–Verhás-reológia jó mennyiségi egyezést mutattak az elméleti várakozásokkal. A jövőben, hasonló, de nagyobb pontossággal és megbízhatósággal megvalósított kísérletekkel egy teljes kvantitatív egyezés is elérhető lehet. Így például már a jelenlegi adatok lehetővé teszik, hogy a képlékeny folyáshatárt beazonosítsuk 100 MPa körülre (a feszültség szintre, ahol a 3a. ábrán a tranziens megfigyelhető, a hőmérséklet pedig emelkedni kezd a képlékeny disszipáció megindulása miatt), és a képlékenyedés utáni és előtti meredekségek hányadosából a képlékeny sebességi együttható értékére adhatunk közelítő becslést [$\gamma \approx 0,17$, ld. (18)], de ezekből a szempontokból nagyobb pontosságra van szükség. Ha a kísérleti elrendezés képes elegendően gyors fel- és leterhelést biztosítani (melyre a reológia tanulmányozása miatt van szükség), miközben minden nyúlási, erő- és hőmérsékletadat megbízhatóan és nagy pontossággal rendelkezésre áll, akkor az összes anyagi együttható leillesztése után az 5. szakaszban látott numerikus séma az egész időbeli folyamatot reprodukálni tudhatja.

Az időfüggések jóslására mutatott numerikus séma mellett módszert mutattunk a reológiai együtthatók leillesztésére, mely kevés adat esetén is jól vizsgázott. Hangsúlyoztuk annak fontosságát, hogy a keresztirányú megnyúlás is mindig mérve legyen, mert ez óriási mértékben megkönnyíti az illesztés feladatát, mert felosztja a problémát két kisebb és közvetlenebbül elvégezhető részre (deviatorikus és gömbi), míg a nyolc paramétert nemlineárisan tartalmazó egytengelyű eredő szituáció gyakorlatilag kezelhetetlen lehet.

A mechanikai mennyiségek nyomon követésén felül értékes további információt szolgáltat a hőmérséklet mérése. A rugalmas, reológiai és képlékeny viselkedésformák ugyanis a hőmérséklet időbeli alakulásán is jól látható nyomot hagynak. A termikus és mechanikai aspektusok összefüggése miatt valójában csak úgy nyerhetünk zárt, megoldható egyenletrendszert, ha a hőmérséklet is teljes jogú tagként van kezelve. A termodinamika-alapú megközelítés rávilágít a hőmérséklet jelentőségére olyan folyamatok esetén is, melyek hagyományosan pusztán mechanikainak voltak tekintve.

A kísérleti adatok elemzése egyértelműen láttatta a reológia jelentőségét a vizsgált műanyag minta esetén, de hasonló tapasztalatok ismertek jóval „szilárdabb” anyagok, így kőzetek esetén is [23][24][25]. Ami első ránézésre nemlineáris rugalmasságnak tűnik egy feszültség–megnyúlás–görbén, az időbeliség elemzése után könnyen bizonyulhat reológiának. Fontos viszont arra is odafigyelni, hogy a kísérleti elrendezésben (a terhelés kivitelezésében és kontrollálásában, a mérőeszközök viselkedésében stb.) fellépő késleltetéseket ne keverhessük össze a mintán belüli reológiai késleltetésekkel. Nagy kísérleti gondosságra van szükség – a megfelelő elméleti értelmezés mellett – a szilárd anyagokban zajló reológia megbízható kimutatásához. A megbízható reológiai információk alkalmazási következményei messzenyúlnak (alagutak hosszútávú viselkedése,

szerkezeti anyagok biztonsági kérdései stb.). A termikus, rugalmas és reológiai jelenségek közti összjáték szintén jelentős. A szilárd testek termodinamika-alapú tárgyalása mindezen jelenségek leírására megbízható elméleti keretet biztosít.

KÖSZÖNETMONDÁS

Jelen munkát a Bolyai János Kutatási ösztöndíj, valamint az OTKA K81161 pályázata támogatta.

FÜGGELÉK: A MÉRÉSEK KIVITELEZÉSÉRŐL

A mérések a gödöllői Mezőgazdasági Gépesítési Intézetben történtek, egy Instron 5581 univerzális anyagvizsgáló berendezésen. Az elrendezést a 6. ábra mutatja be.



6. ábra. A mérési összeállítás.

A minták (ld. 1b. ábra) hossz- és keresztirányú méretváltozásait HBM 3/350 XY11 típusú nyúlásmérő bélyegek mérték (7. ábra). A bélyegek ellenállása $R=350\ \Omega$, a bélyegtényező értéke $k=1,98$ ($\pm 1\%$, a gyártó szolgáltatotta technikai paraméterek szerint).



7. ábra. A felbélyegzett minta.

A próbatestre felbélyegzett nyúlásmérő bélyegek félhídban kerültek bekötésre, oly módon, hogy az aktív bélyeg a próbatestre felragasztott bélyeg volt, a hídág másik fele pedig egy tehermentesített fémlemezre került felbélyegzésre. A mérések során a félhíd a Spider-8 mérőerősítő SR-55 vivőfrekvenciás moduljának bemenetére csatlakozott.

A mérésekhez egy ThermaCAM PM695 típusú valós idejű termokamerát használtunk (ld. 1b. ábraaláírás). Emellett egy infravörös hőmérsékletérzékelővel (forgalmazó: Optrics GmbH, OPTCTLT10FCB3 típus) is gyűjtöttünk adatokat.

Szabvány mintákat használtunk, méretezésüket az 1b. ábra mutatja. A megmunkálás után a mintákat tehermentesítés céljából pihentettük, majd a bélyegek felragasztása után kalibráltuk.

IRODALOM

- [1] Matolcsi T. A concept of mathematical physics: models for spacetime. Akadémiai Kiadó (Publishing House of the Hungarian Academy of Sciences), Budapest, 1984.
- [2] Matolcsi T. Spacetime without reference frames. Akadémiai Kiadó (Publishing House of the Hungarian Academy of Sciences), Budapest, 1993.
- [3] Matolcsi T. On material frame-indifference. Arch. Rat. Mech. Anal. 1986;91:99-118.
- [4] Matolcsi T, Gruber T. Spacetime without reference frames: an application to the kinetic theory. Int. J. Theor. Phys. 1996;35:1523-1539.

- [5] Fülöp T, Ván P. Kinematic quantities of finite elastic and plastic deformation. *Math. Meth. Appl. Sci.* 2012;35:1825-1841.
- [6] Fülöp T. Thermal expansion, elastic stress and finite deformation kinematics. In: 10th HEEP International Conference. Budapest: Budapest University of Technology and Economics, Department of Energy Engineering 2011, 227-232.
- [7] Fülöp T, Ván P, Csatár A. In Proceedings of the 12th Joint European Thermodynamics Conference, JETC 2013, Brescia, Italy, July 1-5, 2013, eds. M. Pilotelli and G.P. Beretta, Snoopy, Brescia, 2013, 525-530.
- [8] Fülöp T, Ván P, Csatár A. In Proceedings of the 11th International Conference on Heat Engines and Environmental Protection, Balatonfüred, Hungary, June 3-5, 2013, ed. Gróf Gy., Budapest University of Technology and Economics, Department of Energy Engineering, Budapest, 2013, 147-152.
- [9] Ván P. Internal thermodynamic variables and the failure of microcracked materials. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics* 2001;26(2):167-189.
- [10] Ván P, Vásárhelyi B. Second Law of thermodynamics and the failure of rock materials. In *Rock Mechanics in the National Interest V1*. 2001, Proceedings of the 9th North American Rock Mechanics Symposium, Washington, USA, 2001, eds. D. Elsworth, J. P. Tinucci and K. A. Heasley, Balkema Publishers, Lisse-Abingdon-Exton(PA)-Tokyo, 767-773.
- [11] Ván P, Fülöp T. Universality in heat conduction theory: weakly nonlocal thermodynamics. *Annalen der Physik* 2012;524:470-478.
- [12] Asszonyi Cs, Fülöp T, Ván P. Distinguished rheological models in the framework of a thermodynamical internal variable theory. *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, megjelenés alatt, internetes megjelenés: 20 November 2014, DOI:10.1007/s00161-014-0392-3. E-print-változat: arXiv:1407.0882.
- [13] Neff P, Eidel B, Osterbrink F, Martin R. A Riemannian approach to strain measures in nonlinear elasticity. *C. R. Acad. Sci.* 2014;342:254-257.
- [14] Neff P, Ghiba ID, Lankeit J. The exponentiated Hencky-logarithmic strain energy. Part I: Constitutive issues and rank-one convexity. Preprint, 2014.
- [15] Beatty MF, Stalnaker DO. The Poisson function of finite elasticity. *Journal of Applied Mechanics* 1986;108:807-813.
- [16] Horgan CO, Murphy JG. A generalization of Hencky's strain-energy density to model the large deformations of slightly compressible solid rubbers. *Mechanics of Materials* 2009;79:943-950.
- [17] Plešek J, Kruisová A. Formulation, validation and numerical procedures for Hencky's elasticity model. *Computers and Structures* 2006;84:1141-1150.
- [18] Bruhns OT, Xiao H, Mayers A. Constitutive inequalities for an isotropic elastic strain energy function based on Hencky's logarithmic strain tensor. *Proc. Roy. Soc. London A* 2001;457:2207-2226.

- [19] Rusinko A, Rusinko K. Plasticity and creep of metals. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2011.
- [20] Lubarda VA. On thermodynamic potentials in linear thermoelasticity. *International Journal of Solids and Structures* 2004;41(7):7377-7398.
- [21] Verhás J. Thermodynamics and rheology. Akadémiai Kiadó (Publishing House of the Hungarian Academy of Sciences), Budapest, 1997.
- [22] Kocsis D, Horváth R. Experience acquired in tensile tests of plastics. *Scientific Bulletin Series C: Fascile Mechanics, Tribology, Machine Manufacturing Technology* 2013;27.
- [23] Matsuki K, Takeuchi K. Three-dimensional in situ stress determination by anelastic strain recovery of a rock core. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci. & Geomech. Abstr.* 1993;30:1019-1022.
- [24] Matsuki K. Anelastic strain recovery compliance of rocks and its application to in situ stress measurement. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* 2008;45:952-965.
- [25] Lin W, Kuwahara Y, Satoh T, Shigematsu N, Kitagawa Y, Kiguchi T, Koizumi N. A case study of 3D stress orientation determination in Shikoku Island and Kii Peninsula, Japan. In Ivan Vrkljan, editor, *Rock Engineering in Difficult Ground Conditions (Soft Rock and Karst)*, Proceedings of Eurock'09 Cavtat, Croatia, October 28-29, 2009, Balkema, 2010, 277-282.